DER BUNTE SPLEEN (SUPPLEMENT)

Vektor- & Matrizenrechnung

Dr. rer. nat. Peter Erich Keller

Studienheft Matrizenmathematik

Kolumne zum Studienheft Matrizenmathematik

[Hier redaktionellen Text einfügen]

Die Redaktion

Vorwort des Autors

Seit Werner Heisenberg's Matrizenmechanik sollte allgemein bekannt sein, daß die Matrizenmathematik eine wichtige Rolle in der modernen Wissenschaft spielt. Dieses Studienheft richtet sich vor allem an Studenten der Naturwissenschaften, der Informatik und an BWL/VWL Studenten. Auch Mathematikstudenten werden mal einen Blick in dieses Studienheft werfen, denn der neue Formalismus erlaubt eine neue Sichtweise in der Matrizenmathematik und im Ergebnis auch neue mathematische Formel, die es in keinem anderen Studienmaterial zu finden gibt. Das dieses Studienheft im Journal ‚Der bunte Spleen' erscheint tut der Sache keinen Abbruch. Ganz im Gegenteil, die Einnahmen aus dem Verkauf des Studienheftes kommen nach Abzug der Druckkosten im vollen Umfange der PINEL gGmbH zu Gute.

Dr. rer. nat. Peter Erich Keller

Inhalt

I Einleitung

Matrixelemente

Sehr unterschiedliche mathematische Ausdrücke könnten ein Matrixelement sein. Genau das macht Matrizen so brauchbar und vielfach anwendbar. Ein Element einer quadratischen Matrix oder eines Zeilenvektors könnte – und meistens ist - eine ganze Zahl, eine reelle Zahl oder eine komplexe Zahl. Darüber hinaus können auch mathematische Operatoren und mathematische Funktionen Element einer Matrix sein.

$$\mathbf{31} \qquad \mathbf{2} \;\; -\boldsymbol{i} \qquad \frac{\boldsymbol{\partial}}{\boldsymbol{\partial x}} \qquad \boldsymbol{z} \qquad \mathbf{sin}(\boldsymbol{x})$$

Einige Beispiele für Zeilenvektoren und Matrizen:

Ein Vektor mit den 3-dimensionalen Koordinaten für die räumliche Position eines Atoms oder ein Vektor der die Richtung und Stärke eines physikalischen Impulses darstellt

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} x_{component} & y_{component} & z_{component} \end{pmatrix}$$

Der allseits bekannte Nabla Operator zur Berechnung des Gradienten.

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Die Einheitsmatrix (E-Matrix)

$$\boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

Der Matrixformalismus ermöglicht eine elegante Beschreibung der mathematischen Kalkulation ohne all zu viele Summationen darstellen zu müssen.

Matrixobjekte

Es gibt hauptsächlich zwei wichtige Objekte, einmal der Zeilenvektor zum anderen die quadratische Matrix. Rechteckige Matrizen werden in diesem Studienheft vernachlässigt da sie praktisch keinerlei Relevanz in den üblichen mathematischen Kalkulationen haben.

Zeilenvektoren:

Bei einem Zeilenvektor handelt es sich um eine lineare Anordnung von Matrix(Vektorelementen) in einer horizontalen Sequenz. Wir betrachten den Zeilenvektor als eine 1-Zeilenmatrix mit der Dimension **1xN** – Anzahl der Zeilen x Anzahl der Säulen. Es gibt in der mathematischen Literatur zwei Schreibweisen, ein ‘old fashioned style’ der mit Kommata die Matrixelemente trennt und ein ‚modern style‘ bei dem ohne Kommata geschrieben wird.

Old fashioned style:

$$\vec{\boldsymbol{a}} = (\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}, \;\cdots\; \boldsymbol{a_N})$$

Modern style:

$$\vec{\boldsymbol{a}} = (\boldsymbol{a_1} \quad \boldsymbol{a_2} \quad \boldsymbol{a_3} \quad \cdots \quad \boldsymbol{a_N})$$

Mit Hilfe des Transponierungsoperators kann ein Zeilenvektor leicht in einen Säulenvektor umgewandelt werde. Wir werden uns später darauf beziehen.

Im Folgenden verwenden wir aus Praktikabilitätsgründen eine mit Null beginnende Zählweise.

1xN Zeilenvektor v

$$\vec{\boldsymbol{v}} = (\boldsymbol{v_0} \quad \boldsymbol{v_1} \quad \boldsymbol{v_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{v_{N-1}})$$

Diese mit Null beginnende Zählweise hat viele Vorteile in der Matrizenrechnung, wird aber gemeinhin nicht verwendet.

Grundlegend in der Matrizenrechnung ist der δ-Vektor, definiert durch Krönecker Delta:

$$\vec{\boldsymbol{\delta}} \equiv [\![(\boldsymbol{\delta}]\!]_{0,j}) = (\boldsymbol{\delta}_{0,0} \quad \boldsymbol{\delta}_{0,1} \quad \boldsymbol{\delta}_{0,2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{\delta}_{0,N-1})$$

δ-vektor $\vec{\boldsymbol{\delta}} \equiv (\mathbf{1} \quad \mathbf{0} \quad \mathbf{0} \quad \cdots \quad \mathbf{0})$

Für große **N** geht der δ-Vektor quasi – bis auf einen *scaling* Faktor – über in eine Stützstellenfunktion mit hoher Auflösung der Hosemann’schen 1-dimensionalen Punktfunktion (Prof. Dr. Dr. h.c. R. Hosemann, persönliche Mitteilung).

Quadratische Matrizen:

Unter einer quadratischen Matrix versteht man eine 2-dimensionale Anordnung von Matrixelementen – meistens Zahlen – mit gleicher Zeilen- und Säulenzahl **NxN.**

NxN Matrix M

$$M = \begin{pmatrix} m_{(0|0)} & m_{(0|1)} & \cdots & m_{(0|N-1)} \\ m_{(1|0)} & m_{(1|1)} & \cdots & m_{(1|N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{(N-1|0)} & m_{(N-1|1)} & \cdots & m_{(N-1|N-1)} \end{pmatrix}$$

Der vertikale Strich im Index trennt den Zeilenindex vom Säulenindex. Die mit Null beginnende Zählweise wird wiederum bevorzugt. In der Hauptdiagonalen ist der Zeilenindex gleich dem Säulenindex.

II Matrix Calculus

Matrixmultiplikation

Essentiell für den Matrixmultiplikationsalgorithmus ist das *dot*-Produkt.

Das *dot*-Produkt entspricht einer Matrixmultiplikation eines Zeilenvektors mit einem Säulenvektor – einem transponierten Zeilenvektor.

$$\vec{a}\,(\vec{b} \leftrightarrow a \,[\![\cdot b]\!]^{T} = (\blacksquare(a_{(0|0)} \& a_{(0|1)} \& a_{(0|2)} \& \cdots \& a_{(0|N-1)})) \cdot (\blacksquare(b_{(0|0)} @ b_{(1|0)} @ b_{(2|}$$

$$= a_{(0|0)} b_{(0|0)} + a_{(0|1)} b_{(1|0)} + a_{(0|2)} b_{(2|0)} \cdots + a_{(0|N-1)} b_{(\cdot|0)}$$

$$= \sum_{k=0}^{N-1} a_{(0|k)} b_{(k|0)}$$

Das i,j-te Matrixelement einer Produktmatrix aus zwei quadratischen Matrizen (Matrix AB) ist definiert als das *dot*-Produkt des i-ten Zeilenvektors der ersten Matrix mit dem j-ten Säulenvektor der zweiten Matrix.

$$[\![A \cdot B = ((a \cdot b)]\!]_{(i|j)}) = \left(\sum_{k=0}^{N-1} [\![a_{(i|k)} b_{(k|j)}\right)]\!]$$

Das commutative Gesetz gilt nicht, da es sich bei der Gruppe (M, ·) – Gruppe aus der Menge der quadratischen Matrizen mit der Verknüpfung: Matrixmultiplikation - nicht um eine Abel’sche handelt. Deshalb muß zwischen Linksmultiplikation und Rechtsmultiplikation unterschieden werden

. $A \cdot B \neq B \cdot A$

Das inverse Element der Gruppe (M, ·) wird inverse Matrix genannt und ist definiert durch die Umkehrung der Matrixmultiplikation. Das Matrixprodukt aus einer Matrix und ihrer inversen Matrix ergibt die E-Matrix.

$$A \cdot A^{-1} = E$$

Es gibt in der mathematischen Literatur Algorithmen für die Berechnung einer inversen Matrix.

Das Null-Element der Gruppe (M, ·) wird durch die Nullmatrix dargestellt. Jede Matrixmultiplikation mit der Nullmatrix ergibt immer die Nullmatrix.

$$O = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$A \cdot 0 = 0 \qquad 0 \cdot A = 0$$

Eine Matrix dessen Matrixquadrat gleich der Matrix selbst ist wird idempotent genannt.

$$A \cdot A = A^2 = A$$

Der mathematische Ausdruck mit einer Matrix zur Potenz Null ist definitionsgemäß gleich der E-matrix. Der mathematische Ausdruck einer Matrix zur Potenz 1 ist die Matrix selber.

$$A^0 = E \qquad A^1 = A$$

Die transponierte quadratische Matrix wird definiert als die an der Hauptdiagonalen gespiegelte Matrix. Die Transponierung wird durch Austausch des Zeilenindexes mit dem Säulenindex erzeugt.

$$M^T = \begin{pmatrix} m_{(0|0)} & m_{(1|0)} & \cdots & m_{(N-1|0)} \\ m_{(0|1)} & m_{(1|1)} & \cdots & m_{(N-1|1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{(0|N-1)} & m_{(1|N-1)} & \cdots & m_{(N-1|N-1)} \end{pmatrix}$$

Eine Matrix, die mit ihrer transponierten Matrix identisch, ist wird symmetrisch genannt.

$$[M = (m]_{(i|j)}) = [(m]_{(j|i)}) = M^T$$

<u>Schema für Matrixpotenzen M^n</u>

$$M^{-2}: \mathit{Inverse\ des\ Quadrats}$$

$$M^{-1}: \mathit{Inverse}$$

$$M^{0}: E - \mathit{Matrix}$$

$$M^{1}: \mathit{Identität}$$

$$M^{2}: \mathit{Quadrat}$$

Matrixfunktionen

Es wären in diesem Zusammenhang die beiden Matrixfunktionen det (Determinante) und tr (*trace*) zu nennen. Die Determinante einer 2x2 Matrix berechnet sich nach der Regel: Produkt der Elemente der Hauptdiagonalen minus Produkt der Elemente der Nebendiagonalen. Bei Matrizen größerer Dimension wird in Unterdeterminanten zerlegt.

Der *trace* einer Determinante berechnet sich aus der Summe der Elemente der Hauptdiagonalen.

$$tr(A) = \sum_{k=0}^{N-1} a_{(k|k)}$$

Der *trace* der E-Matrix ergibt die Dimensionalität N.

III Circulare Matrizen

Definition und Calculus circularer Matrizen und block-circularer Matrizen

Eine circulare Matrix wird aus einem Zeilenvektor z generiert.

$$\vec{z} = (z_0 \quad z_1 \quad z_2 \quad \cdots \quad z_{n-1})$$

Mit einem solchen Zeilenvektor wird die circulare Matrix construiert, indem man die folgende Zeile durch Rotation um eine Position erzeugt [Bronstein & Semendjajev]. Als Beispiel dient ein Zeilenvektor aus 5 Elementen:

$$\vec{z} = (z_0 \quad z_1 \quad z_2 \quad z_3 \quad z_4)$$

Die dazugehörende circulare Matrix lautet:

$$Z = \begin{pmatrix} z_0 & z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \\ z_4 & z_0 & z_1 & z_2 & z_3 \\ z_3 & z_4 & z_0 & z_1 & z_2 \\ z_2 & z_3 & z_4 & z_0 & z_1 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 & z_0 \end{pmatrix}$$

Für die Construction einer circularen Matrix aus einem Zeilenvektor wird ein neuer Operator verwendet (*circ*).

$$Z = circ(\vec{z})$$

Der entsprechende Umkehroperator entnimmt einer circularen Matrix den obersten Zeilenvektor aus dem die circulare Matrix construiert ist. Zwei Schreibweisen sind denkbar:

$$\vec{z} = circ^{-1}(Z) \quad \vec{z} = cric(Z)$$

Um Verwechselung mit einer inversen Matrix zu vermeiden wird im Folgenden die – etwas ungewohnte – *cric* Schreibweise verwendet.

Die Circularisierung des δ-Vektors ergibt die E-Matrix.

$$E = circ\left(\vec{\delta}\right)$$

Die inverse Matrix einer circularen Matrix ist ebenfalls circular. Dies ergibt sich aus der, die inverse Matrix definierenden Gleichung:

$$Z \cdot Z^{-1} = E$$

Der die inverse circulare Matrix construierende Zeilenvektor wird, aus Gründen, die man dem folgenden Kapitel Vektor-Faltungsprodukt entnehmen kann, faltungsinverser Zeilenvektor genannt.

Block-circulare Matrizen

Eine block-circulare Matrix besteht aus mehreren circularen Matrizen Z_I, Z_{II}, Z_{III}, Z_{IV}, … , die in circularer Weise angeordnet, eine block-circulare Matrix erzeugen.

Vektor-Faltungsprodukt

Das Faltungsintegral kann auf sehr elegante Art und Weise numerisch durch ein Matrizenprodukt aus einem Zeilenvektor und einer circularen Matrix dargestellt werden (Prof. Dr. H. Bradaczek & Dr. B. Leps, persönliche Mitteilung).

$$f(x) \,\square\, g(x) \quad \leftrightarrow \quad \vec{f} \cdot circ\left(\vec{g}\right)$$

Dies ermöglicht eine Lösung des Faltungsintergrals – auch Faltungsproblem der Kristallographie genannt.

$$\vec{f} \cdot circ(\vec{g}) \cdot [circ(\vec{g})]^{-1} = \vec{f} \cdot E = \vec{f}$$

Die inverse circulare Matrix ist ebenfalls circular. Den faltungsinversen Vektor erhält man durch folgende Berechnung:

$$\vec{g}_{\substack{faltungs\\-invers}} = cric[circ(\vec{g})]^{-1}$$

Zusammenfassend läßt sich formulieren:

$$\vec{f} \cdot circ(\vec{g}) \cdot circ\left(\vec{g}_{\substack{faltungs\\-invers}}\right) = \vec{f} \cdot E = \vec{f}$$

Literatur

Bronstein & Semendjajev, Taschenbuch der Mathematik, VEB Teubner Verlag Leipzig [Übersetzung aus dem Russischen]

The Matrix Cookbook, Kaare Brandt Petersen, Michael Syskind Pedersen Version: Februar 16, 2006

Danksagung

Die freundliche Unterstützung für das Projekt ‚Studienheft Matrizenmathematik' durch die Mitarbeiter der PINEL gGmbH, Frau Vossel MA und Herrn Dipl.-Psych. Marggraf, wird dankend anerkannt.